



TITLE:

P38 Canonical and Grand Canonical Monte Carlo Simulations of Elastic Membranes with Fluidity

AUTHOR(S):

鯉渕, 弘資

CITATION:

鯉渕, 弘資. P38 Canonical and Grand Canonical Monte Carlo Simulations of Elastic Membranes with Fluidity. 物性研究 2002, 79(2): 287-288

ISSUE DATE:

2002-11-20

URL:

<http://hdl.handle.net/2433/97305>

RIGHT:

Canonical and Grand Canonical Monte Carlo Simulations of Elastic Membranes with Fluidity

(茨城高専) 鯉渕 弘資 (koibuchi@mech.ibaraki-ct.ac.jp)

1. 序論およびモデル

脂質膜と呼ばれるような実際の液膜 [1] の Hamiltonian [2] は Polyakov-Kleinert の剛性弦 (rigid string) [3, 4] の Hamiltonian と同じであるため、脂質膜も剛性弦も共通的に研究されてきた [5]。

そのモデルの Hamiltonian は、3 三角形分割された球面上で

$$S_1 = \sum_{(i,j)} (X_i - X_j)^2, \quad S_2 = \sum_i (1 - \cos \theta_i), \quad (1)$$

のように離散化される。 S_1, S_2 はそれぞれ Gaussian energy, bending energy と呼ばれる。 X_i は \mathbf{R}^3 における頂点 i の位置、 (i, j) は近接する頂点 i と j を結ぶボンドを表わす。 θ_i は共通のボンドを持つ 2 つの 3 三角形の間の角度を表わす。

分配関数は

$$Z = \sum_N \sum_T \int \prod_{i=1}^N dX_i \exp(-S(X, T) + \mu N),$$

$$S(X, T) = S_1 + bS_2 \quad (2)$$

と定義される。ここで、 \sum_N, \sum_T は頂点数 (または分子数) N , 可能な 3 三角形分割 T に関する和を表わす。 b, μ は曲げ剛性, 化学ポテンシャルである。

液膜の持つ液体性は、計量 (metrics) の和によって離散的にモデル化されている。ここで、計量の和とは 3 三角形分割の和と頂点数の和である [5]。実際、分子の側方運動、分子の吸着・脱着は T と N に関する和によってそれぞれ実現できる。

De Gennes と Taupin [6] による不屈長 $\xi \sim \exp(\frac{4b\pi}{3k_B T})$ は $1/b \rightarrow 0$ で発散する。 $1/b \rightarrow 0$ は摂動論的 β 関数の (自明な) 固定点でもある。このことから、このモデルの表わす「液膜」が有限の b の値では 2 次相転移を起こさないということがいえる。従って、どんな「液膜」も無限小のスケール以外では常に乱雑であると一般には考えられている。

現在までの数値的研究で得られた結果もこの理論的帰結と首尾一貫している。実際、従来の数値的研究では、 N を固定した計算が行われたが、初期のもの [7] を除き、「このモデルには 2 次相転移がなさそうだ」[8-10] という結果であった。

しかし、文献 [11-14] によれば、 β 関数のゼロ点がある有限の値 (b の値) であり、しかもそのゼロ点で相関長が発散することがあり得るということである。そうすると、少なくとも、適切な条件の下で (ある有限のスケールで) 滑らかになるような「液膜」がある、ということはいえそうである。その「液膜」は不屈長が有限の b の値で発散するから、その「液膜」は任意のスケールで滑らかになりそうである。

筆者らは、「(N が有限の) モデルは有限の $b_c(N)$ で 2 次相転移を持つと考えられる」という結論を MC 法によ

って得た [15]。 N を動的に扱う式 (2) のモデルでも同じである [16]。以下にこれら [15, 16] の結果について述べる。

2. MC 法

変数 X の更新は新しい位置 $X' = X + \delta X$ を Metropolis algorithm によって accept するかどうか決める。 δX は X を中心とする小さな半径の球面上にランダムに値をとる。その半径も acceptance rate が 50 ~ 60% になるようにランダムに値を決める。

3 三角形分割 T の自由度は、bond flip によって更新する。 T に関する rate of acceptance r_T の値は制御することはできない。結果としては、 $r_T = 0.28 \sim 0.31$ 程度になる。

N の更新は、図 1(a),(b) に示すように吸着と脱着の過程によって実行する。吸着は、 $\Delta S = S(\text{new}) - S(\text{old}) - \mu$ とするとき、確率 $\text{Min}[1, \frac{1}{N+1} \exp(-\Delta S)]$ で accept する。脱着は、 $\Delta S = S(\text{new}) - S(\text{old}) + \mu$ とするとき、確率 $\text{Min}[1, N \exp(-\Delta S)]$ で accept する。吸着脱着の rate of acceptance r_N は $r_N = 0.08 \sim 0.16$ 程度である。



FIG. 1. Basic MC processes: (a)adsorption and (b)desorption of vertices.

X 更新のための試行を N 回、続いて T の更新のために N 回試行することを 1-sweep と呼ぶ。 N の更新のための吸着脱着の試行は、5-sweep ごとに、それぞれ 1 回ずつ続けて行う。吸着脱着の試行を頻繁に行うと、平衡状態が保てないからである。

3. 計算結果

はじめに、Canonical MC(Can.MC) の計算結果を示す。図 2(a),(b) には S_2 の揺らぎとしての比熱

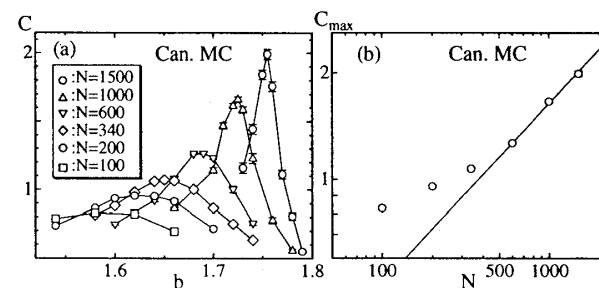


FIG. 2. (a) C_{S_2} vs. b , (b) $C_{S_2}^{\max}$ vs. N in the log-log scale.

$$C_{S_2} = \frac{b^2}{N} (\langle S_2^2 \rangle - \langle S_2 \rangle^2), \quad (3)$$

を示す。図 2(b) から、比熱のピーク値 $C_{S_2}^{\max}$ は $N \geq 600$ で $C_{S_2}^{\max} \sim N^\sigma$ とスケールすることが分かる。最小 2 乗法で求めると、 $\sigma = 0.507 \pm 0.022$ となる。このことは、モデルが形状変動の 2 次相転移を持つことを表わしている。

図3(a)には、平均2乗サイズ

$$X^2 = \frac{1}{N} \sum_i (X_i - \bar{X})^2, \quad \bar{X} = \frac{1}{N} \sum_i X_i \quad (4)$$

を示す。図3(b)には、 C_{S_2} がピーク値を持つ $b_c(N)$ における X^2 の値を N に対して log-log で示す。図の直線は X^2 が $X^2 \sim N^{\frac{H}{2}}$ とスケールすることを表わしている。このとき、 H はフラクタル次元と呼ばれる。図3(b)の直線は膜が臨界点にあるときのデータであるから、その H は臨界フラクタル次元 H_c と呼ぶべきものである。結果は、 $H_c = 3.09 \pm 0.09$ となった。

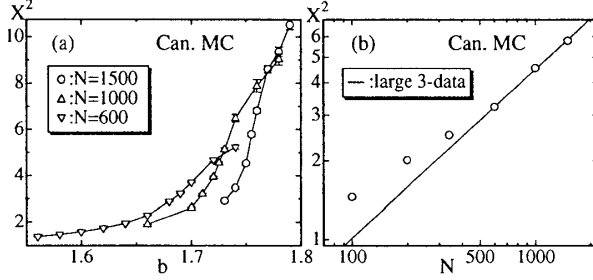


FIG. 3. (a) X^2 vs. b , (b) X^2 obtained at $b_c(N)$.

次は、Grand Canonical MC(G.C.MC)の結果を示す。図4(a),(b)には C_{S_2} を示す。ただし、式(3)で N をその平均値 $\langle N \rangle$ としたもので C_{S_2} を定義している。臨界指数は $\sigma_{S_2} = 0.354 \pm 0.042$ となり、これは図2の場合より少し小さい。

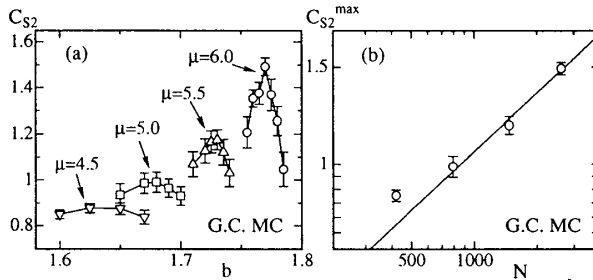


FIG. 4. (a) C_{S_2} vs. b , (b) $C_{S_2}^{\max}$ vs. N in the log-log scale.

図5(a),(b)は分子数の揺らぎ C_N を図4の C_{S_2} と同様に定義したものである。図5も図4と同様にモデルが相転移を持つことをあらわしている。

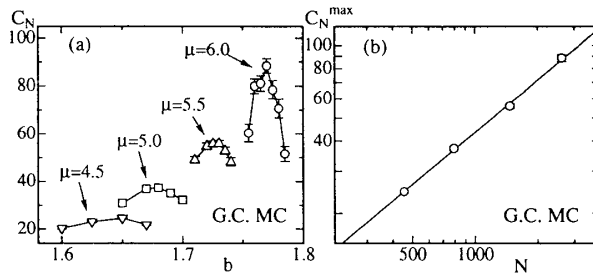


FIG. 5. (a) C_N vs. b , (b) C_N^{\max} vs. N in the log-log scale.

図6(a),(b)には X^2 を示す。ただし、式(4)で $\langle N \rangle$ を用いたものである。臨界フラクタル次元は $H_c = 3.34 \pm 0.64$ である。

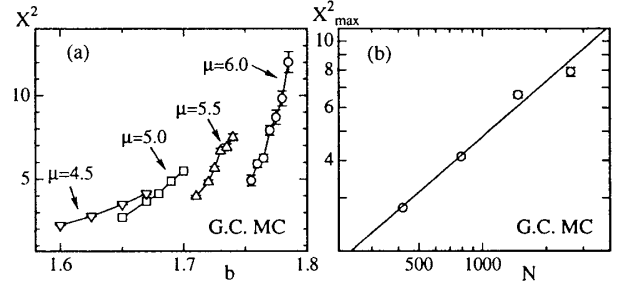


FIG. 6. (a) X^2 vs. b , (b) X^2 obtained at $b_c(N)$.

4. 要約と結論

表面張力と曲げ剛性と液体性（分子の側方拡散）を持つような弾性膜 (Polyakov-Kleinert の弦) に形状変動の2次相転移があることを、Canonical と Grand Canonical MC 法で確認した。この2次相転移は非摂動的な β 関数のゼロ点に対応していると考えられる。この2次相転移は文献 [11–13] の相転移と同じものと考えられる。一方、この相転移が表面張力のない膜モデルに期待される相転移 [14] と同じかどうかについては現在のところ不明である。

- [1] F.David, In *Two dimensional quantum gravity and random surfaces Vol.8*, D.Nelson, T.Piran, Weinberg S. eds. World Scientific, p.87 (1989).
- [2] W.Helfrich, *Z.Naturforsch.* **28c**, 693 (1973).
- [3] A.M.Polyakov, *Nucl.Phys.* **B268**, 406 (1986).
- [4] H.Kleinert, *Phys.Lett.* **B174**, 335 (1986).
- [5] J.F.Wheater, *J.Phys.A:Math.Gen.* **27**, 3323 (1994).
- [6] P.G.De Gennes and C.Taupin, *J.Phys.Chem.* **82**, 2294 (1982).
- [7] S.M.Catterall, *Phys.Lett.* **B220**, 253 (1989).
- [8] M.Bowick, P.Coddington, L.Han, G.Harris and E.Marinari, *Nucl.Phys.Proc.Suppl.* **30**, 795 (1993); *Nucl.Phys.* **B394**, 791 (1993).
- [9] K.Anagnostopoulos, M.Bowick, P.Gottington, M.Falcioni, L.Han, G.Harris and E.Marinari, *Phys.Lett.* **B317**, 102 (1993).
- [10] J.Ambjorn, A.Irback, J.Jurkiewicz and B.Petersson, *Nucl.Phys.* **B393**, 571 (1993).
- [11] F.David and E.Guitter, *Europhys. Lett.* **5**(8), 709 (1988).
- [12] M.E.S.Borelli, H.Kleinert and Adriaan M.J. Schakel, *Phys.Lett.* **A267**, 201 (2000).
- [13] M.E.S.Borelli and H.Kleinert, *Europhys.Lett.* **53**, 551 (2001).
- [14] H.Kleinert, *Euro. Phys. J.* **B9**, 651 (1999).
- [15] H.Koibuchi, *Phys.Lett.* **A300**, 582(2002).
- [16] H.Koibuchi, *submitted to Phys.Lett.A*.